

**0.1. Иванов А.Д., Гренев И.В. Определение распределения пор по размерам адсорбентов и катализаторов с помощью методов машинного обучения**

Наиболее информативными экспериментальными методами исследования пористой структуры адсорбентов и катализаторов являются адсорбционные методы, основанные на анализе изотерм адсорбции газов. Распределение пор по размерам является важной текстурной характеристикой, которая определяет кинетику адсорбции и диффузию газов и жидкостей через пористую среду материалов. Современные методы анализа изотерм адсорбции и определения распределения пор по размерам основаны на решении обратной задачи по разложению экспериментальной изотермы на набор базисных (локальных) изотерм, рассчитанных с помощью теории функционала плотности флюида или метода Монте-Карло для большого канонического ансамбля. Каждая такая локальная изотерма характеризует изменение величины адсорбции газа от давления при фиксированной температуре в поре определенной формы и размера с заданным химическим составом стенок пор. Однако, подобная обратная задача относится к классу некорректных задач (можно говорить некорректно поставленных, но может быть путаница), для решения которых используют различные виды регуляризации. По этой причине конечный вид функции распределения пор по размерам сильно зависит от параметров и вида регуляризации. В данной работе предложен альтернативный метод на основе машинного обучения для анализа изотерм адсорбции и определения функции распределения пор по размерам, который бы не требовал подбора оптимальных параметров регуляризации при анализе каждой новой экспериментальной изотермы.

Для разработки суррогатных моделей необходим большой набор данных для обучения. В данной работе были опробованы несколько подходов для формирования наборов обучающих данных: пар изотерма адсорбции – распределения пор по размерам. Первый подход заключался в параметризации распределения пор по размерам и генерации различных изотерм адсорбции путем решения прямой задачи. Во втором подходе использовались “реальные” распределения пор по размерам, полученные из экспериментальных изотерм адсорбции с использованием классического метода решения обратной задачи без регуляризации. В третьем подходе использованы «реальные» распределения пор по размерам, однако, для их получения из экспериментальных изотерм адсорбции использовалась регуляризация с подбором оптимальных параметров. Полученные суррогатные модели были опробованы для определения распределения пор по размерам на экспериментальных адсорбционных данных для ряда рефе-

ренсных материалов с известной формой и размером пор.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR-2024-0034).*